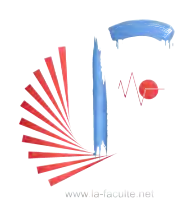
In the name of Allah, the Most Gracious, the Most Merciful













Première partie

STRUCTURE

Aspects statiques de la structure moléculaire

LES ENVIRONNEMENTS DES ATOMES DE LA CHIMIE ORGANIQUE

					Environnements
Liaisons simples	H—	—O(••)(••)—	—N(••)<	—C<	Tétraédrique
Liaisons doubles		=O(••)(••)	=N(••)—	=C<	Trigonal
Liaisons triples			≡N(••)	≡C—	Linéaire

REPRÉSENTATION DES MOLÉCULES

L'information de composition : la formule brute

Elle indique la nature et le nombre des atomes qui constituent la molécule.

Exemple : l'éthanol de formule brute C_2H_6O.

La molécule d'éthanol est constituée de 2 atomes de carbone, de 6 atomes d'hydrogène et d'un atome d'oxygène.

Du graphe des liaisons à la formule de constitution

Il s'agit d'indiquer comment les atomes de la molécule sont liés entre eux.

Exemple : l'éthanol C_2H_6O.

Graphe des liaisons :

	C1	C2	H1	H2	H3	H4	H5	H6	O
C1		+	+	+					+
C2	+				+	+	+		
H1	+								
H2	+								
H3		+							
H4		+							
H5		+							
H6									+
O	+							+	

FORMULES DE CONSTITUTION

Formules développées

Formule développée plane

```
    H   H
    |   |
H — C — C — O — H
    |   |
    H   H
```

Formules (ou représentations) de Lewis

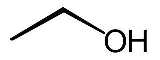
```
    H   H                        H   H
    |   |     ..                 |   |     _
H — C — C — O — H            H — C — C — Ō — H
    |   |     ..                 |   |     ‾
    H   H                        H   H
```

Formules semi-développées

Ne faire apparaître explicitement que les liaisons intéressantes dans un contexte choisi.

$H_3C\text{-}CH_2\text{-}O\text{-}H$ $C_2H_5\text{-}OH$

Écriture topologique



Liaisons C-C représentées par des lignes brisées

Chaque extrémité de segment représente un atome de carbone

La multiplicité des liaisons est figurée

Les atomes d'hydrogène ne sont généralement pas représentés (ils sont en nombre tels que la tétravalence du carbone est assurée).

Les hétéroatomes sont indiqués. Dans ce cas, on représente les atomes d'hydrogène auxquels ils sont liés.

Formule compacte

EtOH

Et = éthyle (éth traduit la présence de 2 atomes de carbone dans le radical)

LE PROBLÈME DE L'INFORMATION TRIDIMENSIONNELLE

L'information tridimensionnelle

Les formules de constitution ne précisent pas l'organisation spatiale des atomes autour de l'atome auquel ils sont liés.

Représentations tridimensionnelles

Modèles moléculaires

Logiciels

Représentations planes des structures spatiales : l'exemple de l'éthanol

REPRÉSENTATION DE CRAM

H H OH H H H
A

H H_3C H OH
B

H H H CH_2OH
C

Conventions

Trait plein: liaison située dans le plan



Trait allongé plein: liaison entre un atome situé dans le plan et un atome situé en avant de ce plan

Trait allongé hachuré: liaison entre un atome situé dans le plan et un atome situé en arrière de ce plan

Remarque : On place généralement la chaîne hydrocarbonée la plus longue dans le plan de la figure (représentation A).

REPRÉSENTATION EN PROJECTION DE NEWMAN

Plan de projection

H H H HO H H

H H H H H OH

Conventions

La molécule est regardée dans l'axe de la liaison entre deux atomes de carbone voisins.

Les liaisons issues des deux atomes sont projetées sur un plan perpendiculaire à l'axe de la liaison étudiée. Les liaisons de l'atome le plus éloigné sont représentées par des segments radiaux s'arrêtant à la périphérie du cercle, celles de l'atome le plus proche sont figurées par des segments issus du centre du cercle.

REPRÉSENTATION DE FISCHER

Conventions

La molécule est regardée selon un axe bissecteur

Les liaisons liants l'atome central aux atomes situés à l'arrière du plan de projection sont projetées sur ce plan et placées verticalement

Les liaisons liants l'atome central aux atomes situés à l'avant du plan de projection sont projetées sur ce plan et placées horizontalement

Remarque : Initialement conçue pour représenter certaines séries (oses, acides aminés), la représentation de Fischer ne devrait être utilisée selon les instances internationales (IUPAC) qu'en appliquant les deux règles suivantes :
i) disposer la chaîne hydrocarbonée la plus longue sur l'axe vertical ;
ii) placer le chaînon de plus petit indice (le plus souvent associé au nombre d'oxydation de l'atome de carbone le plus élevé) vers le haut.

REPRÉSENTATION EN PERSPECTIVE

H H
H H
HO H

Remarque : Les représentations en perspective sont essentiellement mises en œuvre lors de la représentation de molécules cycliques. Exemple : le cyclohexane.

a a
e a e
e e
e e
a
e
a a

LES ISOMÉRIES

Notion d'isomérie

Les isomères sont des espèces chimiques de *même* formule brute qui diffèrent par :
- l'ordre ou la nature des liaisons (**isoméries de constitution**),
- ou par la disposition des atomes dans l'espace (**stéréoisomérie**).

ISOMÉRIE DE CONSTITUTION

Les **isomères de constitution** comprennent les isomères de fonction, de position et de squelette.

Exemple : $C_4H_{10}O$

Isomérie de fonction : les fonctions portées par le squelette diffèrent.

OH

1-Butanol
$T_{éb}$(1 bar) = 117,5°C

O

Ether diéthylique
$T_{éb}$(1 bar) = 34,6°C

Isomérie de position : fonctions et squelette identiques ; seules les positions d'introduction des fonctions sur le squelette diffèrent.

OH

1-Butanol
$T_{éb}$(1 bar) = 117,5°C

OH

2-Butanol
$T_{éb}$(1 bar) = 100°C

Isomérie de squelette : fonctions identiques mais squelettes différents.

OH

1-Butanol
$T_{éb}$(1 bar) = 117,5°C

OH

2-Methyl-1-Propanol
$T_{éb}$(1 bar) = 108°C